

Compitino 1 di Meccanica Quantistica (A-B)

9 Gennaio 2018 - Università di Pisa

(tempo a disposizione: 2 ore)

La somma dei punteggi per le singole domande è 34, lo studente quindi può scegliere a quali quesiti rispondere.

Problema 1

Due particelle di massa m e spin $1/2$ sono vincolate a muoversi lungo un asse, l'asse x . Le particelle interagiscono con un potenziale

$$V(x_1, x_2) = -g \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \delta(x_1 - x_2); \quad g > 0 \quad (1.1)$$

- 1) [4pt] Indicando con $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$ lo spin totale, quali fra le osservabili

$$\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_1^2, \mathbf{s}_2^2, \mathbf{S}, \mathbf{S}^2$$

sono conservate? Si ricordi che per un vettore \mathbf{V} l'affermazione sulla conservazione si riferisce a tutte le componenti.

- 2) [5pt] Il sistema ammette stati legati? In caso affermativo calcolarne l'energia e indicarne la degenerazione.

Problema 2

Un atomo di idrogeno (il nucleo è supposto di massa infinita) si trova in uno stato descritto da una funzione d'onda

$$\psi(\mathbf{r}) = N \left(x^2 - \frac{1}{3} r^2 \right) e^{-r/3a_B} \quad (1.2)$$

- 1) [4pt] Dire quali sono i possibili valori, e le relative probabilità, per una misura di E (energia) ed L .
- 2) [5pt] Dire quali sono i possibili valori, e le relative probabilità, per una misura L_z .

Problema 3

Due particelle di massa m sono vincolate a muoversi lungo l'asse x . Vengono lanciate l'una contro l'altra con impulso \mathbf{p} (nel centro di massa quindi). L'interazione fra le due particelle è

$$V(x_1, x_2) = g \delta(x_1 - x_2); \quad g > 0$$

- 1) [7pt] Qual è la probabilità che nell'urto "rimbalzino" (cioè tornino indietro)?

Problema 4

Si consideri un sistema 3 stati con Hamiltoniana

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & -A & 0 \\ -A & E_0 & -A \\ 0 & -A & E_0 \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

H_0 può essere considerata come un modello per una molecola triatomica lineare, costituita da atomi uguali, in cui un elettrone può effettuare una transizione da un atomo al vicino con ampiezza A .

- 1) [4pt] Si calcolino autovalori ed autostati di questa Hamiltoniana, si usi la notazione $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ per indicare la base in cui è scritta H_0 .

Si supponga ora che il sistema sia sottoposto ad una piccola perturbazione

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & B \\ 0 & & 0 \\ B & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- 2) [5pt] Si calcoli come variano gli autovalori dell'Hamiltoniana, e gli autostati, supponendo che $B \ll A$.

Integrale gaussiano

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{iqx} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx = \sqrt{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{q^2}{2}\sigma^2}$$

Distribuzione di Lorentz (Breit-Wigner)

$$\rho(E)dE = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma/2}{(E - E_R)^2 + \Gamma^2/4} dE$$

Trasformate di Fourier tridimensionali utili

$$\int d^3\mathbf{x} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{r} = \frac{4\pi}{\mathbf{q}^2}; \quad \int d^3\mathbf{x} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \frac{e^{-\mu r}}{r} = \frac{4\pi}{\mathbf{q}^2 + \mu^2}$$

Matrici di Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k; \quad [\sigma_i, \sigma_j] = 2i \varepsilon_{ijk} \sigma_k; \quad [\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}] = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i(\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

Autofunzioni oscillatore armonico

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{\ell}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(x/\ell) \exp(-\frac{x^2}{2\ell^2}); \quad \ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$H_0(\xi) = 1; \quad H_1(\xi) = 2\xi; \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2.$$

Autofunzioni radiali atomi idrogenoidi

$$a \equiv a_B/Z$$

$$R_{1,0} = a^{-3/2} 2e^{-r/a}; \quad R_{2,0} = a^{-3/2} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{r}{a}\right) e^{-r/(2a)}; \quad R_{3,0} = a^{-3/2} \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{r}{a} + \frac{2}{27} \frac{r^2}{a^2}\right) e^{-r/(3a)}$$

$$R_{2,1} = a^{-3/2} \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{r}{a} e^{-r/(2a)}; \quad R_{3,1} = a^{-3/2} \frac{8}{27\sqrt{6}} \frac{r}{a} \left(1 - \frac{1}{6} \frac{r}{a}\right) e^{-r/(3a)}$$

$$R_{3,2} = a^{-3/2} \frac{4}{81\sqrt{30}} \frac{r^2}{a^2} e^{-r/(3a)}$$

Alcuni valori medi sull'atomo di idrogeno

$$|\psi_{n\ell m}(0)|^2 = \frac{1}{\pi} \frac{1}{n^3} \frac{1}{a_B^3} \quad \text{con } \ell = 0, m = 0;$$

$$\langle n, \ell, m | r | n, \ell, m \rangle = \frac{1}{2} (3n^2 - \ell(\ell+1)) a_B; \quad \langle n, \ell, m | \frac{1}{r} | n, \ell, m \rangle = \frac{1}{n^2} \frac{1}{a_B};$$

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi}, \quad Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}.$$

Soluzione problema 1

1) Nel sistema del centro di massa, posto $x = x_1 - x_2$ l'Hamiltoniana si scrive

$$H_{cm} = \frac{p^2}{2\mu} - g \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \delta(x) \quad (1.4)$$

L'Hamiltoniana totale si ottiene aggiungendo l'energia cinetica del centro di massa

$$H = \frac{P^2}{2M} + H_{cm}$$

$M = 2m$ e $\mu = m/2$ (massa ridotta).

Gli operatori \mathbf{s}_1^2 , \mathbf{s}_2^2 , \mathbf{S} , \mathbf{S}^2 commutano con H (scalare) mentre $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2$ non commutano. Gli stati, per la parte di spin, possono essere classificati con S, S_z . La somma di due spin $1/2$ può dare 0 o 1 quindi si avranno stati di singoletto ($S = 0$) e tripletto ($S = 1$). Usando

$$\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_1^2 - \mathbf{s}_2^2) = \frac{1}{2}(\mathbf{S}^2 - \frac{3}{2}) \quad (1.5)$$

e gli autovalori $S(S+1)$ di \mathbf{S}^2 , l'interazione negli stati di singoletto e tripletto ha le forme V_0, V_1 :

$$V_0 = +g_0\delta(x); \quad V_1 = -g_1\delta(x) \quad (1.6)$$

con

$$g_0 = \frac{3}{4}g; \quad g_1 = \frac{1}{4}g \quad (1.7)$$

2) L'interazione è attrattiva solo nello stato di tripletto e nel centro di massa

$$H_{cm} = \frac{p^2}{2\mu} - g_1\delta(x)$$

Posto

$$g_1 = \frac{\hbar^2}{\mu}\beta$$

come è noto il sistema ammette uno stato legato con energia

$$E_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\beta^2$$

Soluzione problema 2

1) La dipendenza esponenziale ed il fatto che la funzione si annulla come r^2 per $r \rightarrow 0$ suggerisce di considerare gli stati con $n = 3$ e $\ell = 2$. In effetti

se scegliamo x come asse polare e chiamiamo α, β gli angoli corrispondenti la funzione d'onda ha la forma

$$\psi = \frac{N}{3}(3 \cos^2 \alpha - 1)r^2 e^{-r/3a_B}$$

e consultando l'elenco delle autofunzioni dell'atomo di idrogeno e le armoniche sferiche si riconosce che

$$\psi \propto R_{32}(r)Y_{20}(\alpha, \beta)$$

Si tratta quindi di uno stato con $n = 3, \ell = 2, \ell_x = 0$. L'energia corrispondente è

$$E_3 = -\frac{1}{2} \frac{1}{3^2} \frac{e^2}{a_B} = -\frac{1}{18} \frac{e^2}{a_B}$$

2) Per calcolare le probabilità relative ad una misura di L_z conviene considerare z come asse di quantizzazione ed usare angoli polari θ, φ rispetto a questo sistema di coordinate. Possiamo scrivere (esprimendo $\cos \varphi$ in termini di esponenziali)

$$x^2 = r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi = \frac{1}{4} r^2 \sin^2 \theta (e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi} + 2)$$

quindi

$$\begin{aligned} x^2 - \frac{1}{3}r^2 &= r^2 \left(\frac{1}{4} \sin^2 \theta (e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}) + \frac{1}{4} 2(1 - \cos^2 \theta) - \frac{1}{3} \right) \\ &= r^2 \left(\frac{1}{4} \sin^2 \theta (e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}) - \frac{1}{6} (3 \cos^2 \theta - 1) \right) = \frac{r^2}{4} \left(\sin^2 \theta (e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}) - \frac{2}{3} (3 \cos^2 \theta - 1) \right) \\ &= \frac{r^2}{4} \sqrt{\frac{32\pi}{15}} \left(Y_{2,2}(\theta, \varphi) + Y_{2,-2} - \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{2}{3} Y_{20} \right) = \frac{r^2}{4} \sqrt{\frac{32\pi}{15}} \left(Y_{2,2}(\theta, \varphi) + Y_{2,-2} - \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{20} \right) \end{aligned}$$

Si riconosce quindi che i valori possibili di L_z sono $\pm 2, 0$. Siccome la somma delle probabilità deve fare 1 si ha esplicitamente

$$P_2 = P_{-2} = C; \quad P_0 = C \frac{2}{3}; \quad C^{-1} = 2 + \frac{2}{3} = \frac{8}{3}.$$

Soluzione problema 3

1) Nel centro di massa il fenomeno descritto nel testo del problema equivale a considerare l'onda riflessa, quindi la probabilità cercata è

$$P = |R|^2$$

dove R è il coefficiente di riflessione. Posto $g = \hbar^2/\mu\beta$, con $\mu = m/2$ massa ridotta, si ha (visto a lezione, o comunque calcolabile dalle condizioni di raccordo):

$$R = -i \frac{\beta/k}{1 + i \frac{\beta}{k}}$$

da cui

$$P = \frac{\beta^2}{k^2 + \beta^2}; \quad \hbar k \equiv p$$

Soluzione problema 4

1) Scrivendo l'equazione caratteristica $\det(H_0 - \lambda) = 0$ si ricavano immediatamente i tre autovalori

$$E_0 = E_0; \quad E_+ = E_0 + \sqrt{2}A; \quad E_- = E_0 - \sqrt{2}A \quad (1.8)$$

Gli autovettori (normalizzati) corrispondenti sono

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |3\rangle); \quad |\pm\rangle = \frac{1}{2}(|1\rangle + |3\rangle \mp \sqrt{2}|2\rangle) \quad (1.9)$$

Come aspettato la degenerazione è rimossa e si hanno 3 livelli non degeneri.

2) Come visto nel punto precedente l'Hamiltoniana H_0 è non degenera, quindi possiamo di sicuro applicare il teorema di Hellmann-Feynman per stimare il cambiamento di energia dovuto a V

$$\delta E_\alpha = \langle \alpha | H_1 | \alpha \rangle; \quad \alpha = 0, +, -$$

La perturbazione V ha come unici elementi di matrice non nulli $V_{13} = V_{31} = B$ e gli elementi di matrice sugli stati $|\alpha\rangle$ si calcolano immediatamente

$$\delta E_0 = -B; \quad \delta E_+ = \delta E_- = +\frac{B}{2} \quad (1.10)$$

Notiamo che la traccia degli spostamenti è nulla, come aspettato visto che $\text{Tr}[V] = 0$.

Conoscendo gli autovalori al primo ordine è immediato calcolare gli autovettori risolvendo i sistemi

$$(H_0 + V)X_\alpha = (E_\alpha + \delta E_\alpha)X_\alpha \quad (1.11)$$

al primo ordine in B .

Se si vuole evitare di scrivere e risolvere le equazioni algebriche si può operare in questo modo. All'ordine considerato gli autovettori (non normalizzati) possono essere scritti nella forma

$$|X_\alpha\rangle = |\alpha\rangle + |\delta_\alpha\rangle; \quad |\delta_\alpha\rangle \perp |\alpha\rangle \quad (1.12)$$

ed al primo ordine i sistemi (1.11) si riducono a

$$H_0|\delta_\alpha\rangle + V|\alpha\rangle = \delta E_\alpha|\alpha\rangle + E_\alpha|\delta_\alpha\rangle$$

che si possono risolvere proiettando sui versori ortogonali al vettore $|\alpha\rangle$ in esame.

In entrambe le procedure il risultato, nella notazione (1.12), è

$$|\delta_0\rangle = 0; \quad |\delta_{\pm}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{B}{4A} \\ 0 \end{pmatrix}$$

In altre parole l'autovettore $|0\rangle$ resta inalterato al primo ordine.